



TITLE:

従来の摂動論によるある発散と Forlorn Termの提案による解決

AUTHOR(S):

川瀬, 茂樹

CITATION:

川瀬, 茂樹. 従来の摂動論によるある発散とForlorn Termの提案による解決. 物性研究 1971, 17(3): 204-218

ISSUE DATE:

1971-12-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/88388>

RIGHT:

従来の摂動論によるある発散と Forlorn Term の提案による解決

電 総 研 川 瀬 茂 樹

(1 1 月 5 日 受 理)

§ 1 従来の摂動論の問題

系の状態の変化する速さを計算するのに、摂動論がよく使われる。けれども従来の摂動法は多くの場合、ある省略のもとになされており、ために適当でないことがある。たとえば高次の摂動で、意味のない発散がでたりする。¹⁾ この発散を取り除くための、従来の摂動論による提案はいずれも成功していない。²⁾³⁾⁴⁾ 実はこの省略はこの場合正しくないからである。この省略される項を Forlorn Term と名づける。筆者はこれらも含めた計算方法を提案する。これは上の発散を解決し、その他の困難をも解決することができる。これがより正しい摂動論である。

従来の摂動論は、変化の前と後でエネルギーが保存されるような項だけを採用して、のこりを捨てる。これはエネルギー保存則である。けれども変化の前と後でエネルギーが不変であるということをあらかじめ要求することは正しくない。エネルギーが保存しない変化も実際は許される。Forlorn Term も考えに入れた摂動論は、上の発散を解決するだけでなく、その他の場合にも従来の摂動論とは異なる結果を与える。

また従来の摂動論では変化のはじめのエネルギー E_i と後のエネルギー E_f の間にエネルギー保存を要求するので $\delta(E_f - E_i)$ の因子を含む。たとえばはじめの状態に戻る割合をもとめようとするとき常に $E_f = E_i$ なので $\delta(0)$ がかかることになる。この発散も実は見かけ上のもので発散するはずがない。この発散も正しく解決される。こうして従来の摂動論のエネルギー保存の考えに基づき思いちがいを明らかにし、より妥当な摂動論を提案する。

§ 2 式の作製

無摂動ハミルトニアン H_0 の固有函数 φ_n と固有値 E_n がわかっているとする。

ハミルトニアン

$$H = H_0 - \lambda H', \quad H_0 \varphi_n = E_n \varphi_n$$

$t < 0$ で系はハミルトニアン H_0 の下にあり、ひとつの固有状態 (φ_i, E_i) にある。 $t \geq 0$ で系はハミルトニアン $H_0 - \lambda H'$ の下にあり波動函数 $\psi(t)$ をもつとし、 $\psi(t)$ を H_0 の固有函数で展開する。

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(t) = (H_0 - \lambda H') \psi(t) \quad (1)$$

$$\psi(t) = \sum_n a_n(t) \varphi_n e^{-iE_n t/\hbar} \quad (2)$$

(2)を(1)に代入して、 φ_n^* をかけて体積積分し、直交性を使えば、

$$i\hbar \dot{a}_n(t) = -\lambda \sum_m H'_{nm} e^{i(E_n - E_m)t/\hbar} a_m(t) \quad (3)$$

振幅 $a_n(t)$ を λ で展開して、

$$a_n(t) = a_n^{(0)}(t) + \lambda a_n^{(1)}(t) + \lambda^2 a_n^{(2)}(t) + \dots \quad (3)$$

これを(3)に代入して、初期条件 $a_n(0) = \delta_{ni}$ を使うと

$$a_n^{(s)}(t) = \frac{i}{\hbar} \sum_m H'_{nm} \int_0^t a_m^{(s-1)}(t) e^{i\omega_{nm}t} dt \quad (4)$$

$$\left(\omega_{nm} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \right)$$

たとえば1次の項と2次の項は

$$a_f^{(1)}(t) = \frac{H'_{fi}}{E_{fi}} (e^{i\omega_{fi}t} - 1) \quad (5)$$

$$a_f^{(2)}(t) = \sum_m \frac{H'_{fm} H'_{mi}}{E_{mi}} \left(\frac{e^{i\omega_{fi}t} - 1}{E_{fi}} - \frac{e^{i\omega_{fm}t} - 1}{E_{fm}} \right) \quad (6)$$

一般に次のように書ける。

$$\begin{aligned}
 a_f^{(s)}(t) &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^s \sum_{m_1, m_2, \dots, m_{s-1}} H'_{fm_1} H'_{m_1 m_2} \dots H'_{m_{s-1} i} \\
 &\quad \times \int_0^t e^{i\omega_{fm_1} t} dt_1 \int_0^{t_1} e^{i\omega_{m_1 m_2} t_2} dt_2 \times \dots \\
 &\quad \dots \times \int_0^{t_{n-1}} e^{i\omega_{m_{s-1} i} t_n} dt_n \\
 &= \left(\frac{i}{\hbar}\right)^s \sum_{m_1, m_2, \dots, m_{s-1}} H'_{fm_1} H'_{m_1 m_2} \dots H'_{m_{s-1} i} \frac{1}{2\pi i} \\
 &\quad \times \int_C \frac{e^{pt} dp}{p(p-i\omega_{fm})(p-i\omega_{fm_2}) \dots (p-i\omega_{fi})} \quad (7)
 \end{aligned}$$

積分路はすべての極をかこむようにとる。従来の摂動論は上の式のうち、
 $p = \omega_{fi}$ の極と $p = 0$ の極の一部分だけを探って、残りを捨てる。たとえば(6)
 式では ω_{fi} の項だけをとって、 ω_{fm} の項を捨てる。このため従来の摂動論は失
 敗することがある。本当はすべての極を考えに入れてはじめて正しい式になる。
 従来の摂動論は ω_{fi} と 0 の極から、

$$\begin{aligned}
 a_f^{(s)}(t) &= \sum_{m_1, m_2, \dots, m_{s-1}} H'_{sm_1} H'_{m_1 m_2} \dots H'_{m_{s-1} i} \\
 &\quad \times \frac{e^{i\omega_{fi} t} - 1}{E_{m_1 i} E_{m_2 i} \dots E_{m_{s-1} i}} \quad (8)
 \end{aligned}$$

とし、さらに

$$\frac{|(e^{i\omega t} - 1)|^2}{t} \cong \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E) \quad (9)$$

という近似をする。それで4次の式は従来の式では、

$$w_f^{(4)} = \lambda^4 \frac{|a_f^{(2)}(t)|^2 + a_f^{(1)*}(t) a_f^{(3)}(t) + a_f^{(3)*}(t) a_f^{(1)}(t)}{t}$$

$$\cong \frac{2\pi}{\hbar} \lambda^4 \sum_{m,n} \left(\frac{H'_{fm} H'_{mi} H'_{in} H'_{nf}}{E_{mi} E_{ni}} + \frac{H'_{fm} H'_{mn} H'_{ni} H'_{if} + c.c.}{E_{mi} E_{ni}} \right) \delta(E_{fc})$$

(9)

という式が使われてきた。しかしこれは不十分である。たとえば $|E_{ni}| \equiv |E_{mi}|$ のときこの式は発散するが、(6)式に戻って考えれば発散していないことがわかる。直接に(7)式を使うことが正しい方法である。

§ 3 見かけの発散と不成功な解決

近藤氏^{1) 2)} は s d の問題で、4次の摂動で、あるグラフに対する量の発散を見出し、これを解決する方法を提案された。ここでは単純なハミルトニアンを取って説明する。

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^+ c_k - \lambda \sum_{kk'} c_k^+ c_{k'}$$

(10)

$$\lambda \rightarrow \cdot, \quad \overrightarrow{k} \rightarrow c_k c_k^+, \quad \overleftarrow{k} \rightarrow c_k^+ c_k$$

と書くと、

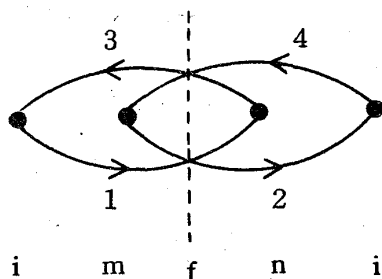


図 1

$$w_a = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{m,n} \frac{H'_{in} H'_{nf} H'_{fm} H'_{mi}}{E_{mi} E_{ni}}$$

$$\times \delta(E_{fi}) >_i$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{1,2,3,4} \frac{f^+(\epsilon_1) f^+(\epsilon_2) f(\epsilon_3) f(\epsilon_4)}{(\epsilon_1 - \epsilon_3)(\epsilon_2 - \epsilon_4)}$$

$$\times \delta(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4)$$

(10)

ここで $\langle \dots \rangle_i$ は初状態に関する熱平均を意味し、縦の点線は終状態を意味する。これは分母が $\varepsilon_1 = \varepsilon_3$ で二次の発散をする。近藤氏は、有限のカット Γ を仮定し、 $(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)^2 + \Gamma^2$ に変えて計算された。($f(\varepsilon)$ はフェルミ分布函数)

けれどもこれは正しくない。固有値 E_n が実数であり、固有函数 φ_n が直交系をなすということが式 (2), (3) を可能にしているのだから、 E_n が虚数を含めば、それ以後の式は成立しない。

三輪氏³⁾ は同じグラフで終状態がひとつずれたものによる寄与 w_b がこの発散をうちけすと述べられた。

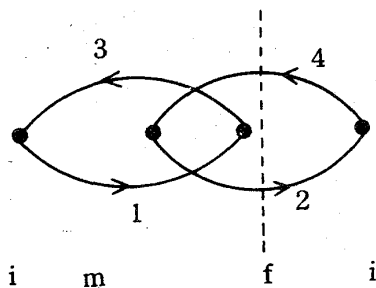


図 2

これも同じく $\varepsilon_1 = \varepsilon_3$ で発散し、前の発散を打ち消すという。けれどもそれは正しくない。(9)に示されるように、これと等しい寄与をもつ複素共役の分が存在する(図3)。それゆえ(11)式は2倍されねばならない。ゆえに発散は

(11)式の分だけ残ることになる。

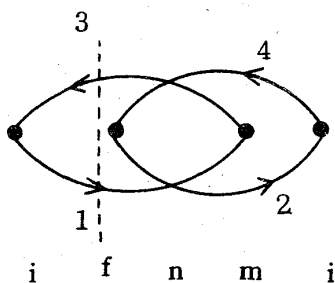


図 3

$$w_b = \frac{2\pi}{\hbar} \left\langle \sum_{m,n} \frac{H'_{if} H'_{fn} H'_{nm} H'_{mi}}{E_{mi} E_{ni}} \times \delta(E_{fi}) \right\rangle_i$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{1,2} \frac{f^+(\varepsilon_1) f^+(\varepsilon_2) f(\varepsilon_3) f(\varepsilon_4) \delta(\varepsilon_2 - \varepsilon_4)}{(\varepsilon_1 - \varepsilon_3)(\varepsilon_1 + \varepsilon_2 - \varepsilon_3 - \varepsilon_4)} \quad (11)$$

Keiter⁴⁾ はこれに関して図4に示すふたつのグラフが相互に発散をうちけすと述べた。

$$\begin{aligned} & \rightarrow \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}} \frac{f_1^+ f_2^+ f_3 f_4 \delta(\epsilon_1 + \epsilon_2 - \epsilon_3 - \epsilon_4)}{(\epsilon_1 - \epsilon_3)(\epsilon_2 - \epsilon_4)} \\ & \rightarrow \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}} \frac{f_1 f_2 f_3^+ f_4^+ \delta(-\epsilon_1 - \epsilon_2 + \epsilon_3 + \epsilon_4)}{(-\epsilon_1 + \epsilon_3)(-\epsilon_2 + \epsilon_4)} \quad (12) \end{aligned}$$

図 4

(12) 式の両式はそれぞれのグラフに対応するもので、それぞれの変数の符号を変えればこれが全く同等のものであることがわかる。Keiter は片方の寄与について符号をまちがったために、これらが打ち消しあうとした。これも正しくない。

§ 4 解 決

式(10)の発散は式(9)の分母の E_{mi} と E_{ni} の絶対値がひとしく $E_{mi} = 0$ の極が二重になることによっておこる。ところが(6)式をみればわかるように $E_{mi} = 0$ は極ではない。 ω_{fi} の項単独であれば一次の極であるが、 ω_{fm} の項があるので $E_{mi} = 0$ の特異性ははじめから存在しない。 $E_{mi} = 0$ の発散は ω_{fm} の項を捨てたことによって生じたもので、実際は生じない。

(7)式を直接に使う。図1に対して

$$\begin{aligned} E_{fm} &= \hbar \alpha_1 & E_{fn} &= \hbar \alpha_2 & E_{fi} &= \hbar(\alpha_1 + \alpha_2) \\ \hbar \alpha_1 &= \epsilon_2 - \epsilon_4 & \hbar \alpha_2 &= \epsilon_1 - \epsilon_2 \end{aligned} \quad (13)$$

ここでは α_1 及び α_2 とともに 0 付近での寄与が問題なのだから、分布関数の影響も無視して、積分範囲を $-\infty$ から $+\infty$ とする。

$$\sum_f a_f^{(2)}(t) a_f^{(2)*}(t) = \frac{-\lambda^4}{(2\pi\hbar^2)^2} \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}}$$

$$\times \int \frac{f^+(\varepsilon_1) f^+(\varepsilon_2) f(\varepsilon_3) f(\varepsilon_4) e^{P't} e^{P't} dP dP'}{P(P-i\alpha_1)(P-i(\alpha_1+\alpha_2))P'(P'+i\alpha_2)(P'+i(\alpha_1+\alpha_2))}$$

(14)

前の負号は P' の積分路が複素共役をとるため右まわりになったので、左まわりに直すからでてくる。 α_1 で積分

する。極は $\alpha_1 = -\alpha_2 + iP'$ である。

この結果を α_2 で積分すれば、こ

れは消える。 $w_a = 0$ である。

(11) 式の w_b も同様に 0 である。

こうして (7) 式から出発すれば
発散がなくなりその上 0 になる。

Forlorn Term も含めた計算で、
あの発散は解決された。

4 次のグラフで上に似たグラフ
に次のものがある。

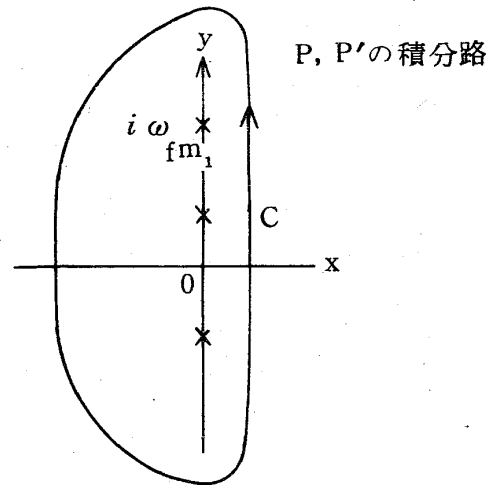


図 5

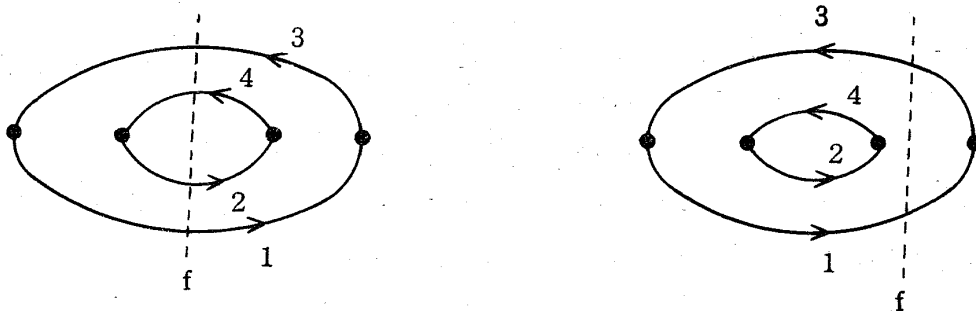


図 6

それぞれに対する遷移確率 w_a' , w_b' は

$$\begin{aligned}
 a' &= \frac{\lambda^4}{t} \frac{-1}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}} \int \frac{f^+(\varepsilon_1) f^+(\varepsilon_2) f(\varepsilon_3) f(\varepsilon_4) e^{Pt} e^{P't} dp dp'}{p(p-i\alpha_1)(p-i(\alpha_1+\alpha_2))p'(p'+i\alpha_1)(p'+i(\alpha_1+\alpha_2))} \\
 &= \left(\frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 \rho^2 k T\right)^2 \frac{t}{2} \quad (15)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 b' &= \frac{\lambda^4}{t} \frac{1}{(2\pi)^2} \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}} \int \frac{f^+(\varepsilon_1) f^+(\varepsilon_2) f(\varepsilon_3) f(\varepsilon_4) e^{Pt} e^{P't} dp dp'}{p(p+i\alpha_1)p(p-i\alpha_2)p'(p'+i\alpha_2)} \\
 &= -\frac{1}{2} \left(\frac{2\pi}{\hbar} \lambda^2 \rho^2 k T\right)^2 \frac{t}{2} \quad (16)
 \end{aligned}$$

(15)(16)の括弧の中の量は二次の確率 w_0 に等しい。 $w_0 t \ll 1$ だから $w_{a'}$, $w_b \ll w_0$ である。これも従来の計算では発散する。 $w_{b'}$ の符号が $w_{a'}$ と異なるのは(7)式の前に i^s の項があるからである。半分になるのは、 α_1 の積分が 2π を出さず π を出すからである。又 $w_{a'} + 2w_{b'} = 0$ でありこの正しさを示している。

一般に $2n$ 次の摂動で n 個の電子空孔対の励起されるグラフでは、それらが交叉すれば(14)式と同じで、確率振幅は0である。交叉しないものでは、終状態がちょうど中央にくる時に $(w_0 t)^n / n!$ となり、終状態がその隣の位置にずれた時に $-(1/2)(w_0 t)^n / n!$ となる。その他の場合に0である。

図7で縦点線のところに終状態があるときの確率振幅 $|a_f(t)|^2$ の値を示す。

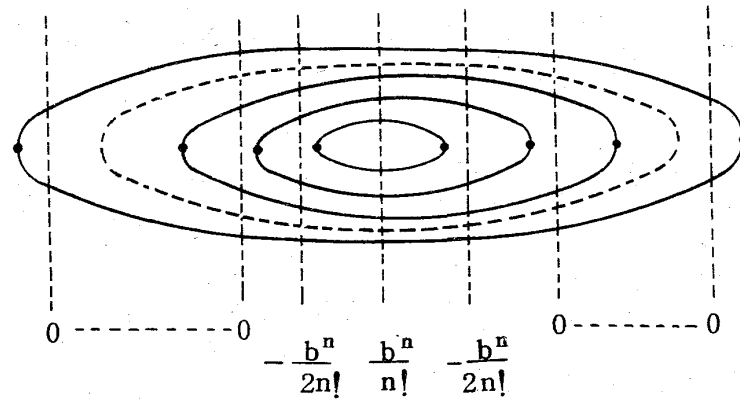


図 7 $2n$ 次摂動
($b = w_0 t$)

§ 5 エネルギー保存からくる発散

(1)式と初期条件から、任意の時刻で、

$$1 = (\Psi(t), \Psi(t)) = \sum_{s=0}^{\infty} \lambda^s \left(\sum_f \sum_{q=0}^s a_f^{(q)}(t) a_f^{(s-q)*}(t) \right) \quad (17)$$

λ はパラメーターであるから、 $s \geq 1$ に対して括弧の中の量は常に0である。また相互作用の順序を決めたグラフはそれ自身パラメーターであるから、あるグラフからの(17)式への寄与の和は常に0でなければならない。図6, 図7のグラフはこの要求を満足している。これは計算結果の正誤の基準のひとつになる。これを「零和の基準」と名づける。

従来の摂動の式は(9)のように常にエネルギー保存のため項 $\delta(E_f - E_0)$ を含んでいる。そのため終状態が初状態に一致するもの、つまり初状態にもどる確率は発散する。実はこの発散は起らない。最低次の二次の場合についてこれを説明する。

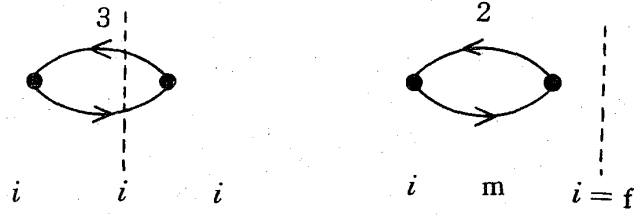


図 8

図 8 の左の図は最低次の確率振幅 b を与える。

$$b = \frac{-\lambda^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}} \int \frac{f^+(\varepsilon_1)f(\varepsilon_2)e^{pt}e^{p't}}{p(p-i\alpha)p'(p'+i\alpha)} dp dp' = \frac{2\pi}{\hbar} (\rho\lambda)^2 k T t \quad (18)$$

右の図からは、発散せずに、

$$\frac{\lambda^2}{(2\pi\hbar^2)^2} \sum_{\substack{1,2 \\ 3,4}} \int \frac{f^+(\varepsilon_1)f(\varepsilon_2)e^{pt}e^{p't}}{p(p+i\alpha)pp'} dp dp' = -\frac{b}{2} \quad (19)$$

となって有限である。だからエネルギー保存の $\delta(E_f - E_i)$ が付く従来の式はこの点でも適切ではない。(18)(19)式は零和の基準を満している。

電子、空孔の生成、消滅が 8 図の n 回のくりかえしとして起る場合、それぞれの終状態に対する値を示す。

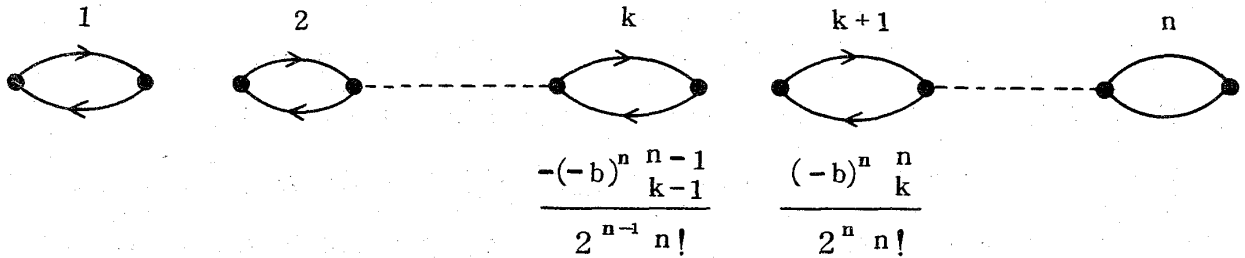


図 9

終状態で電子、空孔対が励起されている確率 $P_e^{(n)}$ は、左の和をとればよい

$$P_e^{(n)} = \sum_{k=1}^n \frac{-(-b)^n}{2^{n-1} n!} \left(\frac{n-1}{k-1} \right) = \frac{-(-b)^n}{n!} \quad (20)$$

初状態に戻っている確率 $P_i^{(n)}$ は右の和をとって、

$$P_i^{(n)} = \frac{(-b)^n}{n!} \quad (21)$$

$P_e^{(n)} + P_i^{(n)} = 0$ だから零和の基準を満たしている。

§ 6 遷移確率についての注意

終状態で電子空孔対が励起されている確率 P_e は $P_e^{(n)}$ の総和をとればよい。

$$P_e = \sum_{n=1}^{\infty} P_e^{(n)} = 1 - e^{-w_0 t} \quad (22)$$

またもとにもどっている確率 P_i は

$$P_i = e^{-w_0 t} \quad (23)$$

(22) 式と (23) 式をみれば、電子空孔対のできる遷移確率は正しく次のように定義できるが、

$$w \equiv \frac{1}{P_i} \frac{dP_e}{dt} \quad (24)$$

この場合 w_0 に一致する。 w_0 は

$$w_0 = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum_f |a_f^{(2)}(t)|^2}{t} \quad (25)$$

で求めたものである。一般に

$$w_0' = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\sum_f |a_f(t)|^2}{t} \quad (26)$$

できめられる w_0' (t を含まないもの) と (24) 式の w が一致するとはじめから決めることはできないが、この例やその他の筆者の試みた例では一致する。

§ 7 エネルギー保存に関する注意

従来の摂動論が先験的に守ろうとしたものはエネルギー保存則であり、ために $\delta(E_f - E_i)$ の因数を持つ。この因数が不適切であることを前に示した。これは無摂動ニミルトニアンに対するエネルギー保存であって、これは必ずしも

保存しなくてよいのである。(7)式による計算では $E_f \neq E_i$ の場合でも遷移確率がありうる。次のハミルトニアンを考える。

$$\begin{aligned}
 H_0 &= \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + \hbar \omega_1 b^\dagger b + \hbar \omega_2 c^\dagger c \\
 H' &= -i\lambda \sum_{kk'} c_k^\dagger c_{k'} (b - b^\dagger) - \mu (b^\dagger c + c^\dagger b) \\
 [b, b^\dagger] &= 1, \quad [c, c^\dagger] = 1, \quad \omega = \omega_1 - \omega_2
 \end{aligned} \tag{27}$$

終状態でエネルギー ω_2 のボソンがひとつへり, ω_1 のボソンがひとつふえるとすると $E_f - E_i = \hbar\omega$ で 0 でない定数である。従来の計算法ではこの遷移は禁止される。

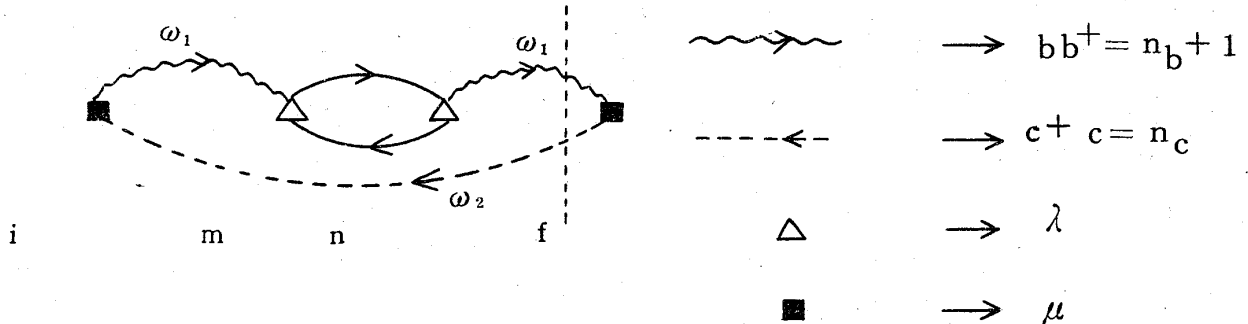


図 10

$$\begin{aligned}
 w_f &= \frac{1}{t} a_f^{(3)}(t) a_f^{*(1)}(t) \\
 &= \frac{1}{t(2\pi\hbar^2)^2} \sum_{1,2} \int \frac{n_c(n_b+1)^2 f^{+}(\epsilon_1) f(\epsilon_2) e^{p't} e^{p't}}{p(p-i(\omega_1 - \frac{\epsilon_1 - \epsilon_2}{\hbar})) p(p-i\omega) p'(p+i\omega)} dp dp' \\
 &\cong -\frac{1}{2} \left\{ \frac{2\pi}{\hbar} \cdot \frac{(\lambda\mu\rho)^2 kT}{(\hbar\omega)^2} \right\} n_c(n_b+1)^2
 \end{aligned} \tag{28}$$

となって 0 でない確率をもつ。みかけ上エネルギー保存則のなりたたない遷移も許される。

§ 8 物理量にあらわれる相異

これまでに、従来の摂動論と Forlorn Term も含めた摂動論の違いを述べてきた。これが実際の物理量の計算値にくいちがいをもたらすのは当然である。次に (27) のハミルトニアンで ω_2 のボソンの緩和時間を計算するが、この例では、従来の方法による値の 2 倍の量を与える。

終状態で ω_2 のボソンがひとつふえている確率はつぎの 8 つのグラフからの寄与がある。

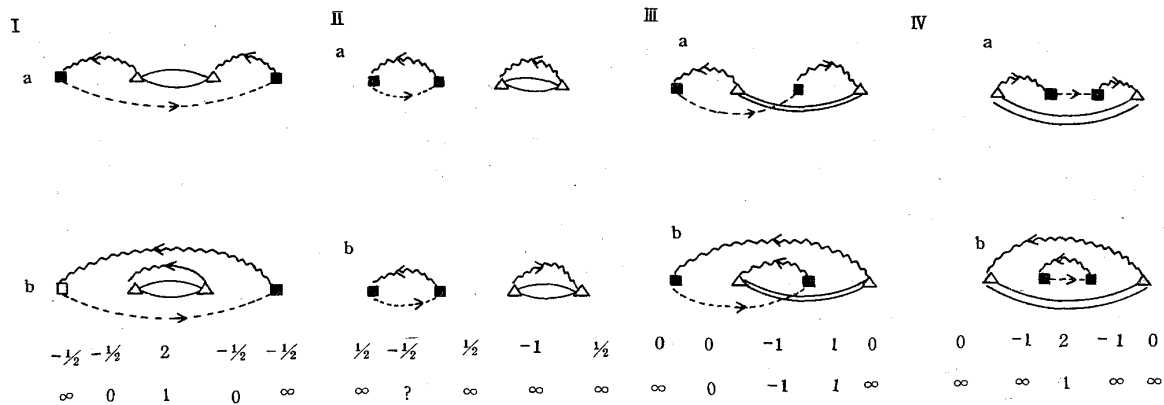


図 1.1

図中で同じギリシャ数字に対する a, b の図は、行列要素が異なるが、遷移確率の値に関しては同等で、それぞれの位置に終状態がくるときの遷移確率の値を (28) 式の中括弧の中の量を単位としてその下に示した。上の数字は正しい摂動論によるもので、下は同じものに対する従来の摂動論によるものである。

Ⅲ に対しては殆んど一致するが、Ⅰ, Ⅱ, Ⅳではことなり、特に Ⅱでのくいちがいは著しい。Ⅱ, Ⅲは対称のものがあるので、2倍しなければならない。

表にすると、

グラフ		行列要素 $M \times (n_c + 1)$	正しい摂動 N_1	従来の摂動 N_2	対称性 s
I	A	n_b^2	$(-\frac{1}{2}) + 2 + (-\frac{1}{2}) = 1$	1	1
	B	$n_b(n_b - 1)$			
II	A	n_b^2	$-\frac{1}{2}$	不明 多分 0	2
	B	$n_b(n_b + 1)$			
III	A	$n_b(n_b + 1)$	-1	-1	2
	B	$n_b(n_b - 1)$			
IV	A	$(n_b + 1)^2$	2	1	1
	B	$n_b(n_b - 1)$			

表 1

全確率は $M \times N \times S$ の合計をとればよい。正しい摂動ではこの確率 $w(n_c \uparrow)$ は $M \times N_1 \times S$ の合計より、

$$w(n_c \uparrow) = 2(n_c + 1)A$$

$$A = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{(\lambda \mu \rho)^2 kT}{(\hbar \omega)^2} \quad (29)$$

従来の摂動では同じものは

$$w(n_c \uparrow) = (n_c + 1)A \quad (30)$$

となって半分である。但し従来の摂動論は種々の点で曖昧であって、IIのグラフに対する寄与は $\delta(\omega)/0$ の項をもつので決められない。けれども従来の摂動法はこのようなグラフはふつう捨ててしまうので0とみて計算した。

$w(n_c \uparrow)$ は実際の線幅のひろがりやその他の緩和機構で測れる物理量に結びつ

いている。従来の摂動論と提案する摂動論の違いはこの例のように実際の物理量の値にも現われる。

§ 9 あとがき

従来の式に従う限り解決のできなかった発散の問題はForlorn Term も含めた式によってはじめて解決される。

またエネルギー保存を常に要求するのも正しくない。全ハミルトニアンに対するエネルギー期待値は不変でなければならないが、その一部の無摂動ハミルトニアンの期待値は変化してもさしつかえない。 $\{\phi_n\}$ はもはや系の固有状態ではないからである。エネルギー保存を先験的に要求し、Forlorn Term を捨てる従来の摂動論の誤りはまた、図 1 1において零和の基準を殆んど満していないことから明らかである。(正しい摂動法によるものはこれを満している。)

このようにして、従来の摂動論の適用限界がわかる。従来の摂動論で計算してさしつかえない場合も多い。けれども発散を伴うばあいとか、無摂動ハミルトニアンが離散的固有値を持つばあい、その他特異な場合はForlorn Term も含めた式に戻って考えるべきである。ただし従来の式を使ってよい時でも、たとえば(9)式で $E_{mi}=0$ の一次の極をふつう主値積分するが、その妥当性は(6)式で ω_{fm} の項があって、 $E_{mi} = 0$ は特異点ではなく極ではないということに由来するのだということを理解しておくほうがよい。(これは筆者が東大物性研に在学中に行なったものである。)

文 献

- 1) J. Kondo , Y. Zohta ; Prog. Theor. Phys. 34 325 (1965)
- 2) J. Kondo ; 同 上 34 523 (1965)
- 3) H. Miwa ; 同 上 34 1040 (1965)
- 4) H. Keiter; Zeit. f. Physik 214 22 (1968)